

李涵榮 助理教授

LI, HAN-JUNG



聯絡方式：

辦公室：理學 208 室

分機：3308

研究室：化學 204 室

分機：3309

傳真：03-2653399

E-mail: hjli@cycu.edu.tw

學歷：

國立臺灣師範大學化學系
博士（2006-2011）

經歷：

國立陽明交通大學 應用化學系
博士後研究員（2023-2026）
工業技術研究院 材料與化工研究所 研究員（2016-2023）
美國史丹佛大學 化學工程系
博士後研究員（2013-2015）
國立臺灣師範大學 化學系 博士
後研究員（2011-2013）

授課科目：

化學數學、普通化學

材料計算化學研究室

研究興趣

本實驗室專注於計算化學模擬，以電腦輔助技術，進行能源材料與功能性有機分子的開發與優化。我們藉由量子力學模擬，由微觀電子結構與分子軌域出發，深度解析化學反應路徑、過渡態及動力學性質。整合電腦輔助材料設計，以計算結果引導實驗設計策略，建立高效的材料設計流程，縮短研發週期。

研究方向

1. **能源材料異相催化模擬：**運用量子力學模擬技術進行能源相關材料異相催化模擬，預測催化活性、選擇性及反應動力學分析。
2. **化學反應機制模擬：**化學反應路徑與動力學機制模擬，解析反應過渡態、活化能及分子軌域作用。
3. **電腦輔助材料設計：**運用電腦輔助技術，設計高效能源材料與功能性有機分子，透過電腦模擬加速材料開發縮短研發週期

代表著作

1. Lian-Ming Lyu,[#] Yu-Chung Chang, [#] Han-Jung Li, [#] (equally contribution) Pei-En Wang, Ruei-Hung Juang, Ming-Yen Lu, Cheng-Shiuan Li, Chun-Hong Kuo* Turning the Surface Electronic Effect over Core-Shell CoS₂-Fe_xCo_{1-x}S₂ Nanooctahedra towards Electrochemical Water Splitting in the Alkaline Medium *Advanced Science* **2025**, 12, 2411622.
2. Lian-Ming Lyu,[#] Han-Jung Li, [#] (equally contribution) Ren-Shiang Tsai, Ching-Feng Chen, Yu-Chun Chuang, Cheng-Shiuan Li, Jeng-Lung Chen, Te-Wei Chiu,* and Chun-Hong Kuo* In Operando X-ray Spectroscopic and DFT Studies Revealing Improved H₂ Evolution by the Synergistic Ni-Co Electron Effect in the Alkaline Condition *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2024**, 16, 27329-27338.
3. Han-Jung Li, Adam C. Lausche, Andrew A Peterson, Heine A Hansen, Felix Studt, Thomas Bligaard* “Using Microkinetic Analysis to Search for Novel Anhydrous Formaldehyde Production Catalysts” *Surf. Sci.* **2015**, 641, 105-111.
4. Han-Jung Li and Jia-Jen Ho* “Theoretical Calculations on the Oxidation of CO on Au₅₅, Ag₁₃Au₄₂, Au₁₃Ag₄₂, and Ag₅₅ Clusters of Nanometer Size” *J. Phys. Chem. C*, **2012**, 116, 13196-13201.